

А. С. КУЦЕНКО, д-р техн. наук, профессор НТУ;  
И. И. МАРЧЕНКО, ассистент НТУ «ХПИ»

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ ТОНКИХ ПЛЕНОК ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Сформулирована математическая модель метода молекулярной динамики, учитывающая эффекты квантовой статистики. Предложена численная схема решения предложенной модели. Проведены тестовые расчеты и выполнено сравнение с экспериментальными данными. Получены результаты расчета средних смещений приповерхностных атомов меди для различных температур.

**Ключевые слова:** математическое моделирование, молекулярная динамика, квантовая статистика.

Сформульована математична модель методу молекулярної динаміки, що враховує ефекти квантової статистики. Запропоновано чисельна схема вирішення запропонованої моделі. Проведено тестові розрахунки та виконано порівняння з експериментальними даними. Отримані результати розрахунку середніх зсувів приповерхневих атомів міді для різних температур.

**Ключові слова:** математичне моделювання, молекулярна динаміка, квантова статистика.

The mathematical model of the molecular dynamics method, which takes into account the effects of quantum statistics was formulated. Numerical scheme for the solution of the model was proposed. Test calculations and comparison with experimental data were obtained. The average displacements of copper surface atoms at different temperatures were computed.

**Keywords:** mathematical modeling, molecular dynamics, quantum statistics.

**Введение.** В настоящее время мощным направлением в исследовании процессов структурообразования тонких пленок является метод математического моделирования, в котором реальный процесс заменяется математической моделью. Математическое моделирование позволяет обнаружить новые физические закономерности в сложных неравновесных системах.

В данное время для исследований процессов структурообразования тонких пленок на атомарном уровне наибольшее распространение получил метод молекулярной динамики (МД) [1–2]. МД хорошо описывает поведение системы при высоких температурах. Однако в области температур ниже 300К важную роль начинает играть квантовая статистика, что не дает возможности применение классического метода МД.

В последние годы ряд исследовательских групп пытается распространить метод МД на системы, подчиняющиеся квантовой статистике [3–5], однако ими не было получено методов, позволяющих учитывать квантовые эффекты в полной мере.

**Математическая модель.** Динамические свойства металлов можно описать следующей системой обобщенных уравнений Ланжевена со случайной силой, описываемой цветным коррелированным шумом  $\Xi$

$$\begin{cases} M\ddot{\mathbf{x}}^{(i)} = \mathbf{F}^{(i)} - \Gamma\dot{\mathbf{x}}^{(i)} + \Xi^{(i)} \\ \dot{\Xi}^{(i)} = \frac{(\mathbf{0}^{(i)} - \Xi^{(i)})}{t_c} \end{cases}, \quad (1)$$

где  $M$  – масса атома,  $\mathbf{x}^{(i)}$  – вектор координат  $i$ -го атома в системе, состоящей из  $N$  частиц, ( $i = 1..N$ ),  $\mathbf{0}^{(i)}$  описывает белый шум,  $\mathbf{F}^{(i)} = -\frac{\partial U(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(N)})}{\partial \mathbf{x}^{(i)}}$  – сила, действующая на  $i$ -й атом со стороны атомов окружения,  $U(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(N)})$  – потенциальная энергия системы, точки сверху обозначают производную по времени.

В открытых системах на атом, находящийся в контакте с тепловым резервуаром, действует как сила со стороны других атомов  $F$ , так и случайная сила  $\Xi$ . Ограничения на движения частиц, накладываемые квантовой механикой, можно ввести при помощи коррелированного цветного шума  $\Xi(t)$ , который описывается случайным процессом Орнштейна-Уленбека:

$$\langle \Xi(t)\Xi(t') \rangle = 2M\Gamma kT \frac{1}{t_c} \exp\left(-\frac{t-t'}{t_c}\right), \quad (2)$$

где  $\Gamma$  – коэффициент диссипации,  $k$  – постоянная Больцмана,  $T$  – температура. Параметр  $t_c$  модели может быть задан при помощи следующей зависимости от температуры:

$$t_c = \frac{\hbar\sqrt{e-2}}{kT}, \quad (3)$$

где  $\hbar$  – постоянная Планка.

**Численная модель.** Для численного решения системы стохастических дифференциальных уравнений (1) был предложен алгоритм первого порядка по времени, основанный на методе Верле решения уравнений движения [6]. В предложенном алгоритме в начальный момент задается начальное значение векторов случайной силы

$$\Xi_0^{(i)} = \sqrt{2M\Gamma kT\lambda} \mathbf{R}_{norm}, \quad (4)$$

где  $\mathbf{R}_{norm}$  – вектор случайных Гауссовых чисел,  $\lambda = 1/t_c$ . В дальнейшем проводится следующий цикл по времени:

$$\begin{cases} \mathbf{F}_n^{(i)} = -\frac{\partial U(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(n)})}{\partial \mathbf{x}^{(n)}} \\ \Xi_n^{(i)} = \Xi_{n-1}^{(i)}(1 - \lambda \Delta t) + \lambda \sqrt{2M\Gamma kT \Delta t} \mathbf{R}_{norm} \\ \mathbf{V}_{n+1/2}^{(i)} = \left( \mathbf{V}_{n-1/2}^{(i)} + \frac{(\mathbf{F}_n^{(i)} + \Xi_n^{(i)})}{M} \right) (1 - \Gamma) \\ \mathbf{x}_{n+1}^{(i)} = \mathbf{x}_n^{(i)} + \mathbf{V}_{n+1/2}^{(i)} \Delta t \end{cases}, \quad (5)$$

где индекс внизу обозначает значение величины в дискретный момент времени  $n\Delta t$ , а сверху – номер атома,  $i = 1..N$ ,  $\Delta t$  – шаг по времени.

**Результаты моделирования.** Структура приповерхностной области материала существенно влияет на такую характеристику, как среднеквадратичные смещения атомов. Эта величина измеряется экспериментально. В данной работе эта характеристика была рассчитана для различных поверхностей меди. На рис. 1 приведена температурная зависимость среднего отклонения атомов для поверхности (100). Как видно из рисунка наблюдается хорошее согласие между экспериментальными данными и результатами моделирования, предложенным в данной работе методом.

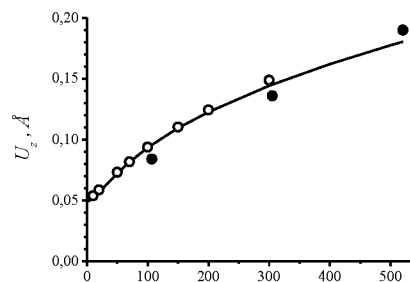


Рис. 1 – Изменение среднеквадратичных смещений на поверхности (100) меди. Полые маркеры – МДЦП расчеты, заполненные – экспериментальные данные [7]. Сплошная линия – расчеты в гармоническом приближении по плотности фононных состояний

На рис. 2 приведены результаты расчетов изменения нормированных среднеквадратичных отклонений атомов по глубине для различных температур (рис. 2, а – поверхность (100) меди, рис 2, б – поверхность (110) меди). Как видно из рисунка, поверхностная структура пленки оказывает

значительное влияние на поведение приповерхностных атомов, находящихся на глубине до  $40 \text{ \AA}$ . Было установлено, что ориентация кристалла существенным образом влияет на изменение смещений атомов (как видно из рис. 2б, для поверхности меди (110) наибольшее отклонение имеют не поверхностные атомы, а атомы второго слоя).

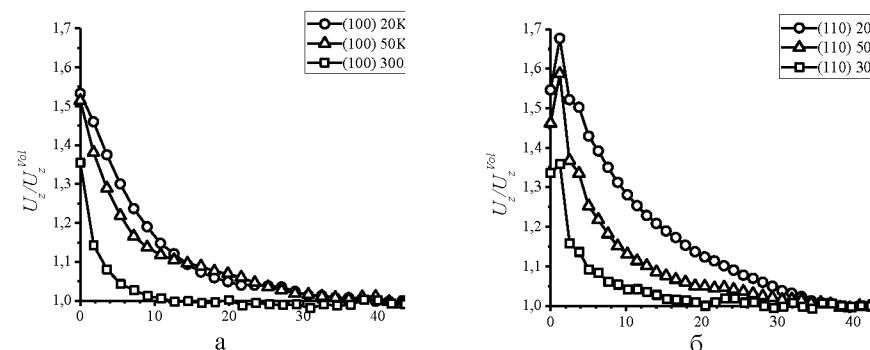


Рис. 2 – Изменение среднеквадратичных нормированных смещений атомов меди по глубине  $z$  при различных температурах, а – поверхность меди (100), б – поверхность меди (110).  $U_z^{vol}$  – среднеквадратичное смещение в объеме материала

**Выводы.** Сравнение результатов компьютерного моделирования с аналитическими расчетами и экспериментальными данными показывает, что предложенный в данной работе метод моделирования процесса структурообразования тонких пленок может быть использован для моделирования процессов модификации наноструктуры поверхностных слоев материалов в широком диапазоне температур для установления влияния параметров технологических процессов образования пленок на нанохарактеристики получаемых материалов.

**Список литературы:** 1. Haile J. M. Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods / J. M. Haile. - Chichester : Wiley, 1992. - 489 p. 2. Allen M. P. The Art of Molecular Dynamics Simulation / M. P. Allen, D. J. D. C. Rapaport. - Cambridge: Cambridge University Press, 1996. - 564 p. 3. Dammak H. Quantum Thermal Bath for Molecular Dynamics Simulation / H. Dammak, Y. Chalopin, M. Laroche // Phys. Rev. Lett. - 2009. - Vol. 103. - P. 190601-190605. 4. Wang J. S. Quantum Thermal Transport from Classical Molecular Dynamics / J. S. Wang // Phys. Rev. Lett. - 2007. - Vol. 99. - P. 160601-160605. 5. Buyukdagli S. Computation of the temperature dependence of the heat capacity of complex molecular systems using random color noise / S. Buyukdagli, A. V. Savin, B. Hu // Phys. Rev. - 2008. - Vol. E 78. - P. 066702-066715. 6. Verlet L. Computer «Experiments» on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules / L. Verlet // Phys. Rev. - 1967. - Vol. 159. - P. 98-103. 7. Fowler D. E. Structure and dynamics of the Cu (001) surface investigated by medium-energy ion scattering / D. E. Fowler, J. V. Barth // Phys. Rev. - 1995. - Vol. B52. - P. 2117-2124.

Надійшла до редколегії 03.12.2012